

Incidencia del diámetro de las partículas sobre la tortuosidad en un medio poroso usando Lattice Boltzmann method

Mayken Espinoza^{1,2}, Martin Andersson², Bengt Sundén²

¹Centro de Energías Renovables y Alternativas, CERA, Escuela Superior Politécnica del Litoral, Km. 30.5 Vía Perimetral, Guayaqui, Ecuador
masespin@espol.edu.ec, mayken.espinoza_andaluz@energy.lth.se

²Department of Energy Sciences, Lund University, Ole Römers väg 1, PO Box 118, 22100 Lund, Sweden

Resumen. En medios porosos, la tortuosidad es una medida de la complejidad del medio. Debido a que experimentalmente la tortuosidad es difícil de ser determinada, diferentes metodologías han sido implementadas para poder calcularla. Gracias a las herramientas computacionales y su facilidad para describir el comportamiento de fluidos en medios complejos, el método de Lattice Boltzmann (LBM) es aplicado en el presente estudio. Conocer el valor de la tortuosidad en medios porosos ayuda a describir el comportamiento de los fluidos a través de dicho medio a nivel microscópico. El objetivo de este estudio, en dos dimensiones, es determinar la incidencia del diámetro de las partículas sobre la tortuosidad. Para un medio poroso con porosidad constante, establecida en el modelado, el comportamiento del fluido es estudiado considerando diferentes números de partículas sólidas circulares. La variación de la tortuosidad con el número de partículas es analizada, y la dependencia de la tortuosidad con la dirección principal del flujo es demostrada.

Palabras Clave: Porosidad, Tortuosidad, Medios porosos, Diámetro de partícula, Lattice Boltzmann method.

1 Introducción

Varios parámetros microscópicos tales como porosidad, tortuosidad, permeabilidad, etc., están involucrados en el estudio de los materiales porosos. Dichos parámetros microscópicos tienen incidencia sobre el comportamiento de los fluidos cuando fluyen a través de los medios.

Las variables consideradas en el presente estudio son la porosidad y la tortuosidad. La forma en que son computadas dichas variables será detallado en la siguiente sección. La tortuosidad y porosidad tienen gran incidencia en propiedades estudiadas en diferentes campos del saber, ya sea en ingeniería civil (asfalto poroso), ciencias energéticas (tortuosidad en las membranas de las celdas de combustible) e incluso en ciencias médicas (tortuosidad vascular) [1-3].

Aunque se han realizado muchos estudios para establecer una relación entre la porosidad y la tortuosidad como es descrito por Shen et al. [4], por lo general, las relaciones propuestas no consideran como variable el diámetro de las partículas sólidas que conforman el medio poroso. El objetivo de este estudio es analizar el comportamiento de la tortuosidad cuando el diámetro de las partículas cambia, manteniendo el valor de la porosidad como constante.

Los medios porosos utilizados en el presente estudio son creados digitalmente y el comportamiento del fluido a través del medio es determinado utilizando el método de lattice Boltzmann (LBM). Esta metodología ha probado ser una herramienta poderosa para resolver problemas en medios complejos y a diferentes escalas de longitud [5, 6]. Mas detalles respecto a la metodología son presentados en la Sección 2. A continuación, las variables computadas en los medios porosos son definidas.

1.1 Porosidad

Es una propiedad de los materiales, que bajo ciertas circunstancias, permite el flujo de fluidos (líquido o gas) a través de él. La porosidad de un determinado material se puede definir como la relación entre el volumen vacío (aire por donde puede transitar el fluido) y el volumen total (aire y material sólido) ocupado por dicho material. Debido a que el presente estudio se desarrolla para casos en dos dimensiones, la expresión se adapta a la siguiente forma:

$$\varepsilon_{2D} = \frac{\text{Área libre}}{\text{Área total}} = \frac{\text{Área libre}}{\text{Área libre} + \text{Área sólido}}. \quad (1)$$

Donde ε_{2D} representa la porosidad en dos dimensiones, es una cantidad adimensional y debe encontrarse entre los valores de 0 y 1. En ocasiones la porosidad se puede representar en porcentaje, e.g., el material tiene una porosidad del 45%. Frecuentemente se diferencia entre porosidad y porosidad efectiva, debido a que en los modelos implementados en este estudio todo espacio vacío puede ser ocupado por el fluido, la porosidad y la porosidad efectiva tienen el mismo valor.

1.2 Tortuosidad

La tortuosidad es una medida de la complejidad del medio poroso. Esta variable puede ser determinada luego de conocer el comportamiento del fluido a través de dicho medio. Una vez que el fluido ingresa a la región del medio poroso, el fluido puede seguir diferentes trayectorias. La tortuosidad se puede calcular como la razón entre la trayectoria que sigue el fluido y la trayectoria más corta posible (la línea recta). De acuerdo al estudio presentado por Navobati y Sousa [7], la tortuosidad puede ser calculada como sigue:

$$\tau = \frac{\sum_{i,j} u_{mag}(i,j)}{\sum_{i,j} |u_x(i,j)|}. \quad (2)$$

Donde τ es la tortuosidad, que así como la porosidad, es una cantidad adimensional. u_{mag} representa la magnitud del vector velocidad para cada posición, mientras que en el denominador solo se considera la velocidad en la dirección principal del fluido. La tortuosidad siempre tiene un valor mayor o igual a la unidad, siendo igual a la unidad en el caso en el que la porosidad del material es de 1, i.e., ausencia total de material sólido en el medio.

2 Metodología

Los medios porosos son generados digitalmente y corresponden a un cuadrado de $200\ lu \times 200\ lu$. Donde lu es la unidad de longitud usada en la metodología aplicada. Las condiciones de frontera son aplicadas de acuerdo a la dirección principal del flujo. Por lo tanto, si se asume como dirección principal del flujo de izquierda a derecha ($x+$), en los bordes izquierdo y derecho se aplica la condición gobernada por presión, mientras que en la frontera superior e inferior se aplican condiciones de borde periódicas. La Figura 1 muestra las características principales del medio, así como también las condiciones de borde aplicadas.

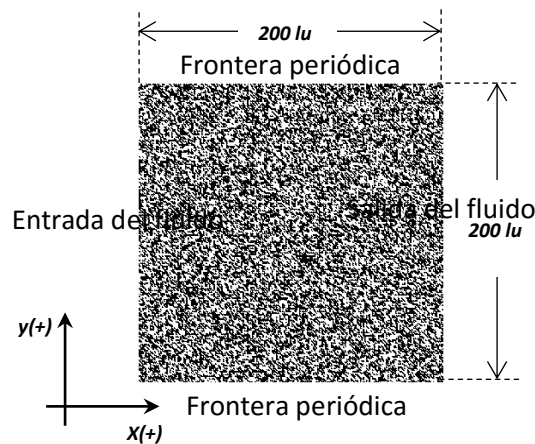


Fig. 1. Medio poroso generado digitalmente. La porosidad del material mostrado en la Figura es del 50%. Bajo las condiciones mostradas en el esquema, la dirección principal del movimiento del fluido es de izquierda a derecha. El diámetro de las partículas analizadas en el presente estudio es considerablemente mayor.

Para todos los medios porosos modelados en el presente estudio, se establece el mismo valor de porosidad. El código de generación de los medios porosos se condiciona para que la porosidad sea invariante independientemente del número de partículas en el medio.

El número de partículas que se ubican en el medio poroso va desde 1 hasta un número total de 15. Todas las partículas que forman parte del medio poroso tienen

forma circular, de tal manera que a mayor número de partículas menor diámetro. Una vez que los modelos son obtenidos, la porosidad es calculada utilizando la ecuación (1). Para cada modelo, el comportamiento del fluido es determinado en dos direcciones principales de flujo, en la dirección $x+$ (de izquierda a derecha) y la dirección $y+$ (de abajo hacia arriba).

Luego de que el campo del campo de velocidad ha sido computado aplicando LBM, la tortuosidad se determina para cada medio poroso y para cada dirección principal de flujo utilizando la ecuación (2).

La columna vertebral de LBM es la ecuación de Boltzmann, que se expresa como sigue [8]:

$$\frac{\partial f(r, t)}{\partial t} + c \cdot \nabla f(r, t) = \Omega \quad (3)$$

Donde f representa la función de distribución de partículas, c es la velocidad del fluido, r el vector posición y t el tiempo. El operador de colisión es Ω y puede ser determinado de varias maneras, dependiendo del fenómeno a analizar. Las etapas principales en el método de Lattice Boltzmann se conocen como “streaming” y “collision”, la transferencia de momento o energía se dan debido a estos procesos en cada iteración. Una vez que se establecen las condiciones de frontera e iniciales, se efectúa el algoritmo hasta alcanzar una solución de estado estable.

Bajo las condiciones mencionadas en esta sección, un total de treinta simulaciones son llevadas a cabo para determinar las diferentes variables involucradas en el presente estudio.

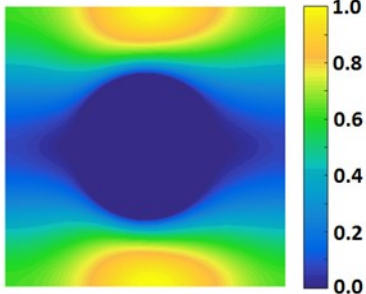
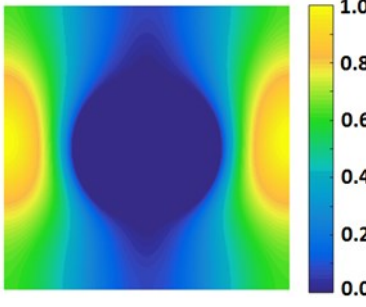
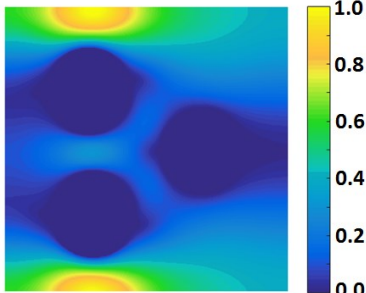
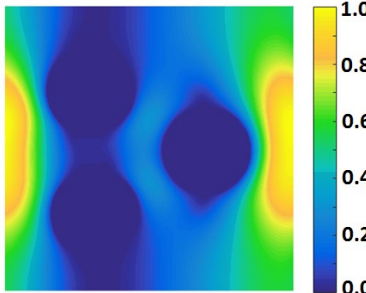
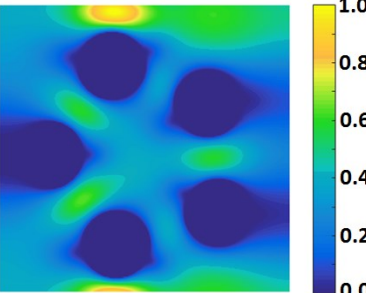
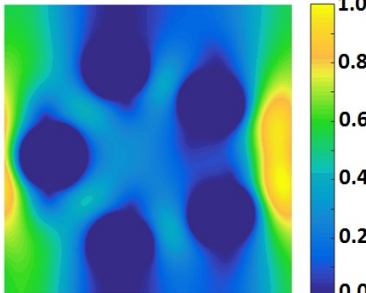
3 Resultados y Discusión

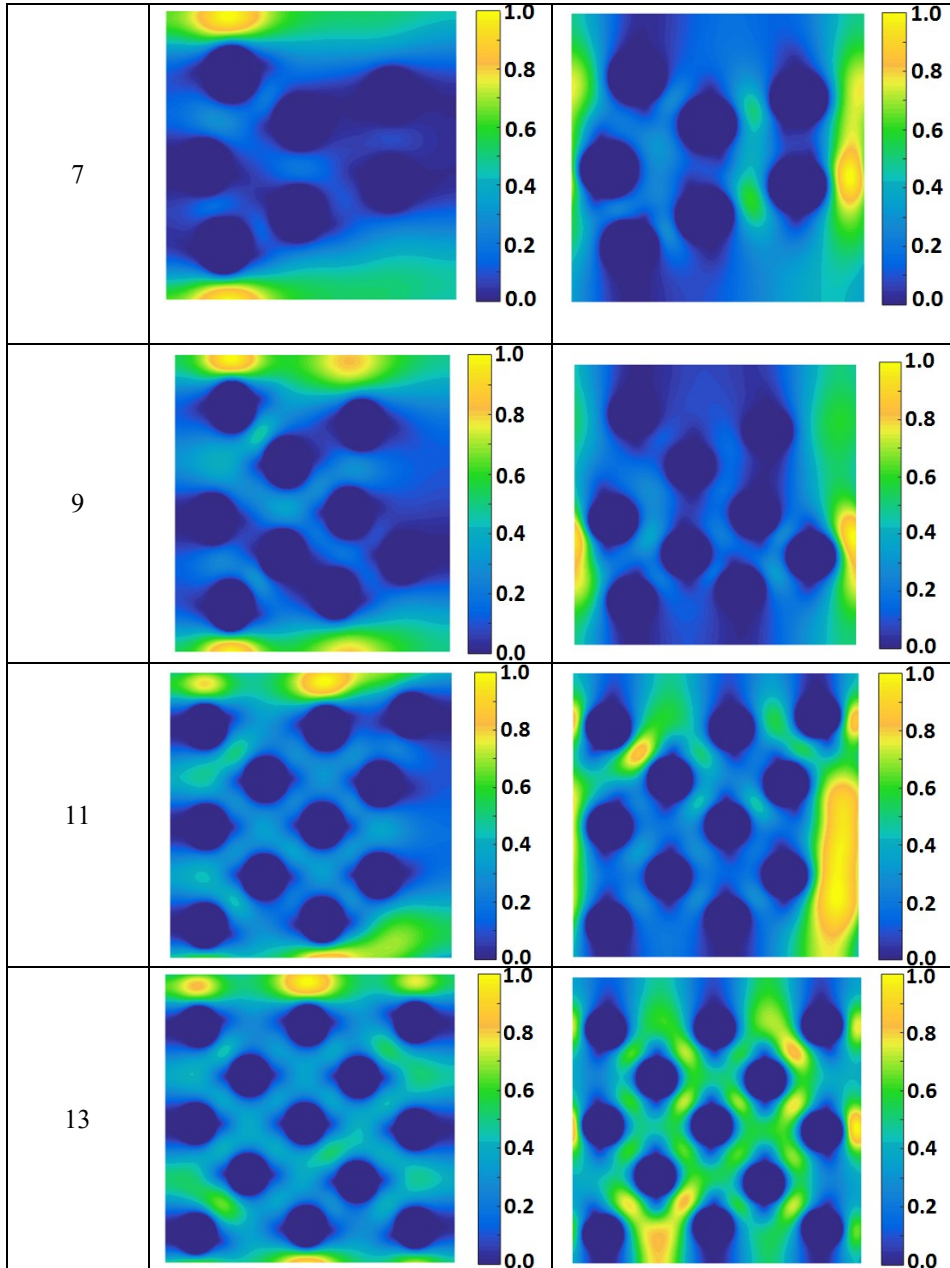
En la presente sección, los resultados obtenidos en las simulaciones son presentados. El campo de velocidad para algunos de los medios porosos cuando el fluido se mueve en las dos direcciones mencionadas, i.e., dirección $x+$ y dirección $y+$. La porosidad es determinada para cada uno de los 15 medios porosos, así como también la tortuosidad es determinada de acuerdo al campo de velocidad obtenido.

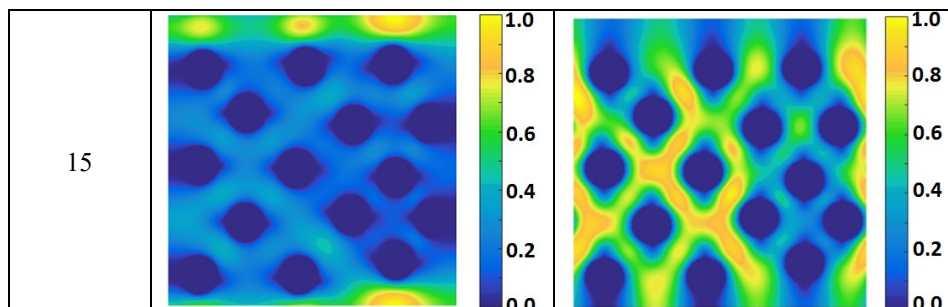
3.1 Campo de velocidad

El campo de velocidad para cada medio poroso es calculado por medio del LBM, a continuación se presentan los resultados de varios medios porosos seleccionados. La velocidad ha sido normalizada respecto al mayor valor encontrado en el campo de velocidad. Los resultados son mostrados en la Tabla 1.

Tabla 1. Campo de velocidad para distintos medios porosos. El color amarillo representa altas velocidades y el azul velocidad cero. Las partículas sólidas se consideran impermeables, por lo tanto la velocidad que lleva el fluido en los lugares donde se encuentran los sólidos es cero.

# de partículas	Flujo en la dirección $x+$	Flujo en la dirección $y+$
1		
3		
5		





Se puede observar que el comportamiento del fluido depende del número de partículas involucradas, así como también de la dirección en la que ha sido aplicado el gradiente de presión.

3.2 Porosidad vs. Número de partículas

La porosidad es determinada en base a la ecuación (1). Como premisa inicial se tiene que la porosidad es constante ya que la variable considerada en el análisis es el diámetro de las partículas y la tortuosidad. La Figura 2 muestra los resultados de la porosidad para cada uno de los medios porosos.

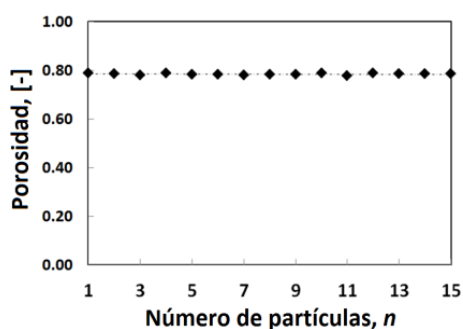


Fig. 2. Gráfico porosidad vs. Número de partículas. El comportamiento de la porosidad con relación al número de partículas se puede considerar invariante teniendo en cuenta que el coeficiente de variación de los datos obtenidos es 0.4%.

El cálculo de la porosidad es 0.784 ± 0.003 . Debido al bajo valor de desviación estándar, y por lo tanto un bajo valor de coeficiente de variación, se puede considerar a la porosidad como invariante respecto al número de partículas involucradas en el modelado.

3.3 Diámetro vs. Número de partículas

En base a los resultados obtenidos, el diámetro de las partículas que forman los medios porosos se compara con el número de partículas involucradas. La Figura 3 muestra los valores del diámetro para el número de partículas.

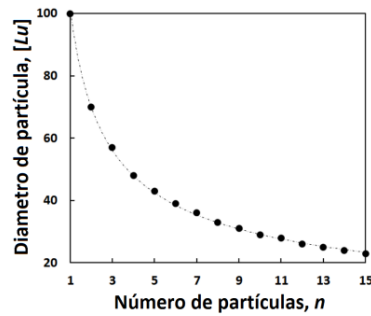


Fig. 3. Gráfico diámetro de partícula vs. Número de partículas. El comportamiento del diámetro de las partículas con relación al número de partículas tiene forma de función potencial. Como es de esperarse, a mayor número de partículas el diámetro disminuye (con porosidad constante).

Teniendo en cuenta los valores observados en la Figura 3, utilizando un ajuste de curva se puede determinar una relación entre ambas variables mostradas. Como resultado se propone la siguiente expresión:

$$\phi = 100.7 n^{-0.5353} [lu]; 1 \leq n \leq 15. \quad (3)$$

Donde ϕ representa el diámetro de las partículas, y n es el número de partículas dentro del medio poroso. Debe tenerse en cuenta que n debe ser un número entero y la función es válida para la porosidad y condiciones del presente estudio. El ajuste de curva con los datos obtenidos muestra un valor de coeficiente de determinación de 0.9994, lo cual muestra un considerable buen ajuste de la curva a los datos.

3.4 Tortuosidad vs. Número de partículas

Los valores de tortuosidad para los 15 medios porosos son calculados en base a la ecuación (2). Debido a que esta variable depende de la dirección principal en la que el fluido se mueve, se determinan dos valores de tortuosidad para cada medio poroso, i.e., cuando el fluido se mueve en la dirección $x+$ y cuando se mueve en la dirección $y+$. La Figura 4 muestra los resultados obtenidos.

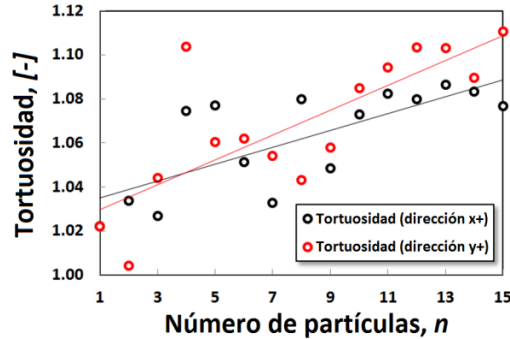


Fig. 4. Gráfico tortuosidad vs. Número de partículas. Se puede observar que a medida que el número de partículas se incrementa, la tortuosidad también aumenta. En el gráfico, los datos de color negro representan los valores de tortuosidad calculados cuando el flujo va en la dirección $x+$, mientras que los datos de color rojo son obtenidos cuando el flujo va en la dirección $y+$.

Aunque la tendencia es clara, la tortuosidad aumenta cuando el número de partículas aumenta tal como se observan las rectas de tendencia en la Figura 4, no se puede establecer una expresión que relacione dichas variables debido a su comportamiento disperso. Sin embargo, se puede observar que los valores de tortuosidad obtenidos cuando el flujo va en la dirección $y+$ son mayores que los obtenidos cuando el flujo va en dirección $x+$. Teniendo en cuenta lo mencionado, los datos de tortuosidad para ambas direcciones son contrastados en la Figura 5. Datos sobre la línea discontinua corresponden a valores de tortuosidad iguales en ambas direcciones de flujo.

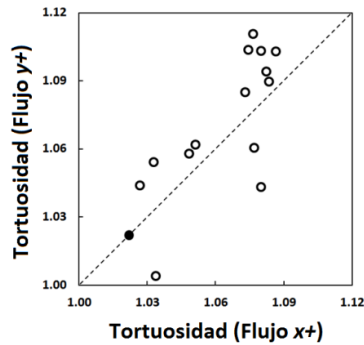


Fig. 5. Gráfico tortuosidad (Flujo $y+$) vs. tortuosidad (Flujo $x+$). Se puede observar que para la mayoría de datos obtenidos, la tortuosidad es mayor cuando el flujo va en la dirección $y+$. El único medio poroso en el cual la tortuosidad es igual en ambas direcciones es cuando se tiene una sola partícula (dato de color negro).

En base a la Figura 5, se puede tabular que en un 73.33% de datos, la tortuosidad cuando el fluido se mueve en la dirección $y+$ es mayor que cuando se mueve en la dirección $x+$. Por el contrario, del total de datos obtenidos el 20.00% resultan en que la tortuosidad es mayor cuando el fluido se mueve en la dirección $x+$.

4 Conclusiones

La incidencia del diámetro de las partículas que conforman un medio poroso sobre la variable tortuosidad ha sido analizado mediante modelado en dos dimensiones. Para un valor invariante de porosidad, el campo de velocidad es calculado usando LBM. La tortuosidad es determinada para cada medio poroso en dos direcciones de flujo establecidos. La expresión que relaciona el diámetro de las partículas con el número de partículas para un valor seleccionado de porosidad ha sido propuesta. Para los medios porosos analizados en el presente estudio, los valores de tortuosidad son mayores cuando el fluido va en la dirección y^+ . Adicionalmente, se concluye que la tortuosidad es mayor cuando el número de partículas aumenta.

Agradecimientos

Este trabajo ha podido ser realizado gracias a los recursos del pueblo ecuatoriano. Adicionalmente, el autor desea expresar su agradecimiento a la ESPOL por la ayuda financiera recibida durante sus estudios doctorales.

Referencias

1. Ganso, J. G., Serrada, C. G., López, M. M., & Echegaray, M. J. H. (2006). Propiedades acústicas intrínsecas de los asfaltos porosos: porosidad, tortuosidad y resistividad al flujo estático de aire. *Diseño óptimo de un asfalto. Acústica*.
2. Espinoza, M., Sundén, B., Andersson, M., & Yuan, J. (2015). Analysis of porosity and tortuosity in a 2d selected region of solid oxide fuel cell cathode using the lattice boltzmann method. *ECS Transactions*, 65(1), 59-73.
3. Pérez-Álvarez, M. J., Escalada-Ferrándiz, A., Hernández-García, E., Moreno-López, M., & Sánchez, J. G. (2009). Hallazgos clínicos y tomográficos en el hamartoma combinado de retina y epitelio pigmentado retiniano: 2 casos. *Studium Ophthalmologicum*, 27, 105-108.
4. Shen, L., & Chen, Z. (2007). Critical review of the impact of tortuosity on diffusion. *Chemical Engineering Science*, 62(14), 3748-3755.
5. Espinoza, M., Sundén, B., & Andersson, M. (2014). Lattice Boltzmann Modeling From the Macro-to the Microscale-An Approximation to the Porous Media in Fuel Cells. In *REGenerative Energien und WAsserstofftechnologie-Symposium, REGWA 2014*.
6. Espinoza, M., Sundén, B., & Andersson, M. (2014). Highlights of Fuel Cell Modeling From a Lattice Boltzmann Method Point of View. In *ASME 2014 International Mechanical Engineering Congress and Exposition* (pp. V06AT07A058-V06AT07A058). American Society of Mechanical Engineers.
7. Nabovati, A., & Sousa, A. C. M. (2009). Fluid Flow Simulation in Random Porous Media at Pore Level Using Lattice Boltzmann Method. In *New Trends in Fluid Mechanics Research* (pp. 518-521). Springer Berlin Heidelberg.
8. Succi, S. (2001). *The Lattice Boltzmann Equation: For Fluid Dynamics and Beyond*. Oxford University Press.

Nomenclatura

\mathbf{u}	Campo velocidad
x^+	Coordenada horizontal
y^+	Coordenada vertical
ϕ	Diámetro, [L ²]
$2D$	Dos dimensiones
f	Función de distribución de partícula
LBM	Lattice Boltzmann Method
mag	Magnitud del vector
n	Número de partículas en el medio poroso
Ω	Operador de colisión
ε	Porosidad, [-]
r	Posición
i	Relacionado con la posición en x
j	Relacionado con la posición en y
t	Tiempo
τ	Tortuosidad, [-]
lu	Unidad de longitud en el sistema equivalente
c	Velocidad